

005

MISTURAS LÍQUIDAS DE DISSULFETO DE CARBONO E HEXAFLUORBENZENO. *Hubert Stassen e Lucas Bourscheid* (Instituto de Química, Departamento de Físico-Química, Laboratório de Química Teórica, UFRGS).

No nosso estudo realizamos cálculos de Dinâmica Molecular para misturas de Hexafluorbenzeno e Dissulfeto de Carbono na fase líquida, nas proporções de 25 %, 50 % e 75 %, bem como para os dois compostos puros, a uma temperatura de 298 K. Utilizou-se como modelo de interação um potencial de Lennard-Jones – representando as forças de Van der Waals. A parte eletrostática da energia potencial foi representada por interações carga(C_6F_6)-quadrupolo(CS_2). Obtivemos funções de distribuição radiais (centro de massa-centro de massa e site-site) e funções de distribuição espaciais. As funções de distribuição radiais centro de massa-centro de massa permitiram avaliar a estrutura local das misturas, o que possibilita uma avaliação da idealidade do sistema. A partir das grandezas termodinâmicas calculadas pudemos realizar comparação entre resultados teóricos obtidos computacionalmente e dados experimentais.